

Joanna KARCZ, Agnieszka RADUCKA, Marcelina BITENC, Marek DOMAŃSKI

e-mail: joanna.karcz@zut.edu.pl

Instytut Inżynierii Chemicznej i Procesów Ochrony Środowiska, Wydział Technologii i Inżynierii Chemicznej, Zachodniopomorski Uniwersytet Technologiczny, Szczecin

Zastosowanie metody CFD do modelowania nieustalonego w czasie przepływu zawiesiny reakcyjnej w bioreaktorze zbiornikowym

Wstęp

W ciągu ostatnich dwóch dekad nastąpił gwałtowny rozwój technik numerycznej mechaniki płynów (CFD), które umożliwiają modelowanie przepływu płynu w różnych układach fizycznych i w różnych aparatach [1]. Syed i wsp. [2] wykorzystali tę metodę do modelowania przepływu w układach biologicznych. Panneerselvam i wsp. [3] zastosowali ją do modelowania pola prędkości zawiesiny w mieszalniku z mieszadłem turbinowym o łopatkach pochylonych i uzyskali dobrą zgodność z wynikami doświadczalnymi. Cantini i wsp. [4] zastosowali metodę numerycznej mechaniki płynów do scharakteryzowania środowiska w skali mikro wewnątrz układu kostnego oraz do określenia sił ścinających w szpiku kostnym. Atmakidis i Kenig [5] określili przy użyciu metody CFD spadki ciśnienia w kolumnie wypełnionej złożem cząstek kulistych. Wang i wsp. [6] modelowali procesu krystalizacji w układzie ciecz – ciało stałe – ciało stałe uzyskując rozkłady cząstek ciał stałych. Jia i wsp. [7] podjęli próbę modelowania przepływu mediów podczas biodegradacji fenolu poprzez *Candida tropicalis* unieruchomione w żelu alginianowym. Proces był przeprowadzany w kolumnie barbotażowej. Joshi i wsp. [8] na podstawie wyników modelowania CFD dla różnych konfiguracji mieszadeł ocenili wpływ sił ścinających na dezaktywację enzymów.

W tej pracy zostały przedstawione wyniki numerycznego modelowania, w warunkach stanu nieustalonego, przepływu zawiesiny reakcyjnej w bioreaktorze zbiornikowym bez przegród, zaopatrzonym w mieszadło turbinowe o łopatkach pochylonych.

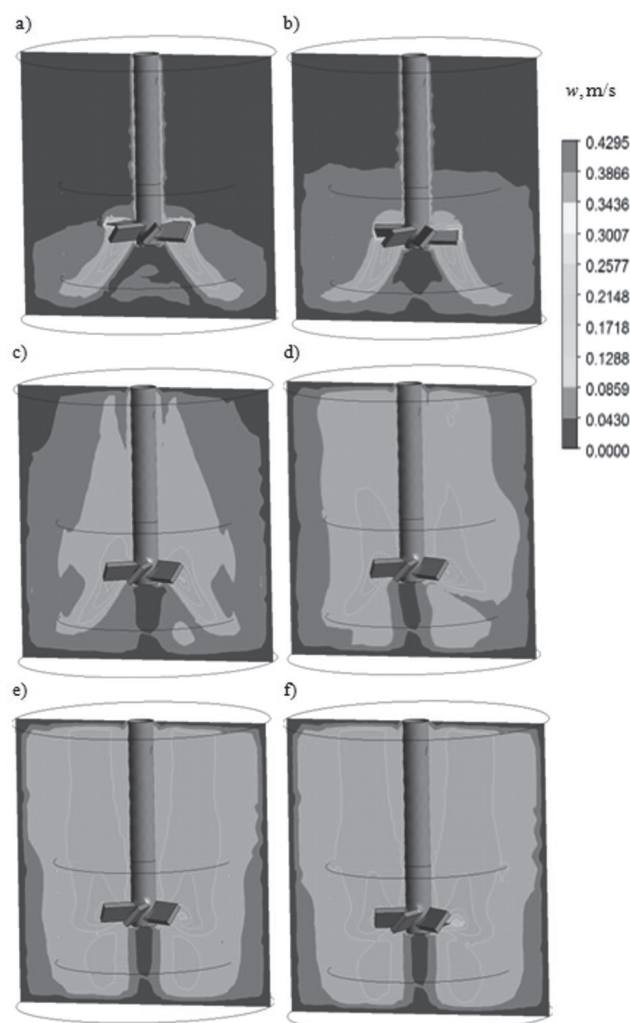
Zakres symulacji

Zawiesinę reakcyjną stanowił wodny roztwór sacharozy o stężeniu $0,05 \text{ mol/dm}^3$ zawierający cząstki pumeksu, będące nośnikiem unieruchomionej inwertazy. Inwertaza jest enzymem katalizującym reakcję hydrolizy sacharozy, w wyniku której uzyskuje się cenny w przemyśle spożywczym i farmaceutycznym cukier inwertowany. Cząstki pumeksu stanowią nośnik do kowalencyjnego wiązania enzymu za pomocą γ -aminopropylotrietoksylanu oraz aldehydu glutarowego. Unieruchomienie enzymu umożliwia wielokrotne i tańsze użycie jego w procesie, a także sprzyja stabilności w środowisku reakcji oraz większej odporności na czynniki zewnętrzne [9].

Obliczenia numeryczne w stanie nieustalonym przeprowadzono za pomocą komercyjnego programu ANSYS CFX 12.1 dla płaskodenno mieszalnika bez przegród o średnicy wewnętrznej $D = 2R = 0,1 \text{ m}$. Zbiornik, wypełniony płynem do wysokości $H = D$, był zaopatrzony w mieszadło turbinowe o sześciu łopatkach pochylonych pod kątem 135° i pompujących płyn w kierunku dna mieszalnika. Mieszadło o średnicy $d = 0,33D$ było umieszczone w odległości $h = 0,33H$, licząc od dna zbiornika. Geometrię aparatu i siatkę numeryczną wygenerowano w preprocesorze *MixSim 2.0*. Zawierała ona ponad 200 tysięcy komórek obliczeniowych. Zastosowano model burzliwości $k-\epsilon$ dla wodnego roztworu sacharozy o gęstości 1006 kg/m^3 i lepkości $1,03 \text{ mPa}\cdot\text{s}$. Dla cząstek pumeksu użyto równania fazy rozproszonej oraz uwzględniono model wielofazowy *particle model* z siłami oporu międzyfazowego zdefiniowanymi za pomocą równania *Schillera-Neumanna*. W obliczeniach testowano trzy różne średnice zastępcze cząstek pumeksu, wynoszące $d_p = 318, 428$ oraz $750 \mu\text{m}$. Udział fazy stałej wynosił $0,015 \text{ m}^3/\text{m}^3$. Zadano krok czasowy $\Delta t = 0,02 \text{ s}$. Częstość obrotów mieszadła n była stała i wynosiła $4,05 \text{ 1/s}$.

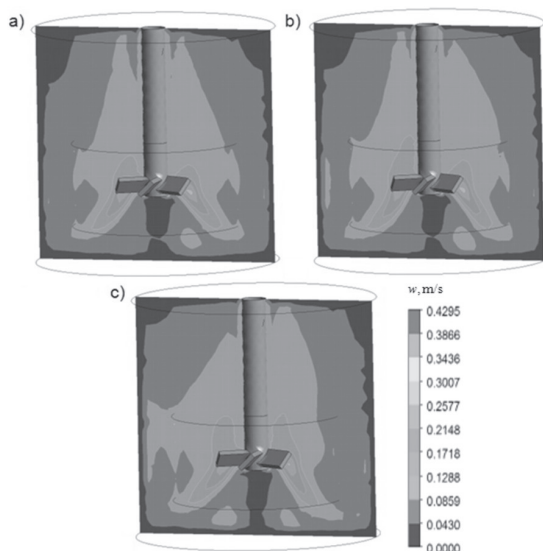
Wyniki badań

Uzyskane wyniki symulacji opracowano graficznie w postaci konturów prędkości płynu i rozkładów składowych wektora prędkości. Na rys. 1 zostały przedstawione kontury prędkości wodnego roztworu sacharozy w zawiesinie cząstek o średnicy zastępczej $d_p = 318 \mu\text{m}$, otrzymane dla czasu mieszania, odpowiednio, $t = 1 \text{ s}, 5 \text{ s}, 10 \text{ s}, 20 \text{ s}, 40 \text{ s}$ oraz 80 s . Wyniki te umożliwiają ocenę profili prędkości wraz z upływem czasu. Największe różnice występują w początkowej fazie mieszania, po czym profile prędkości ujednolicają się, o czym świadczą stosunkowo małe różnice pomiędzy konturami prędkości w czasie $t = 60 \text{ s}$ oraz 80 s . Na rys. 2 porównano, otrzymane dla czasu mieszania 10 s , kontury prędkości wodnego roztworu sacharozy w zawiesinie cząstek o trzech różnych średnicach zastępczych d_p równych $318, 428$ lub $750 \mu\text{m}$.



Rys. 1. Kontury prędkości wodnego roztworu sacharozy w zawiesinie cząstek o średnicy zastępczej $d_p = 318 \mu\text{m}$, odpowiednio dla czasu: a) 1 s, b) 5 s, c) 10 s, d) 20 s, e) 40 s oraz f) 80 s

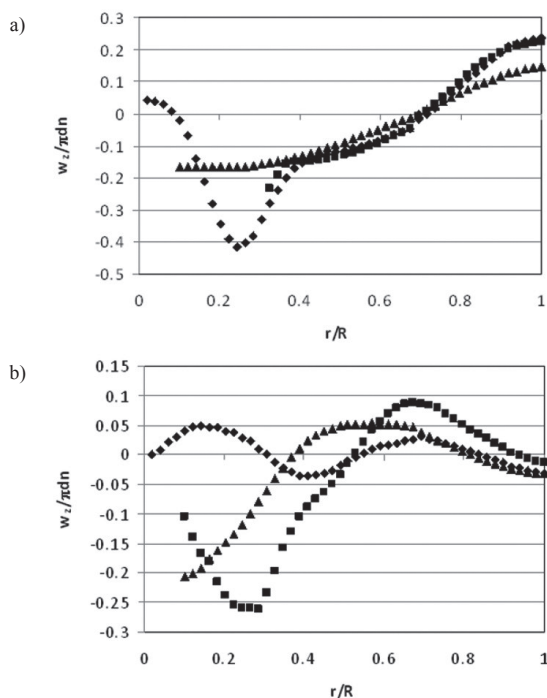
Wyniki te umożliwiają ocenę profili prędkości płynu w zależności od wielkości cząstek ciała stałego i świadczą o tym, że cząstki o większym



Rys. 2. Kontury prędkości wodnego roztworu sacharozy w czasie 10 s w zawieszinie cząstek o średnicy zastępczej d_p , a) 318 μm , b) 428 μm , c) 750 μm

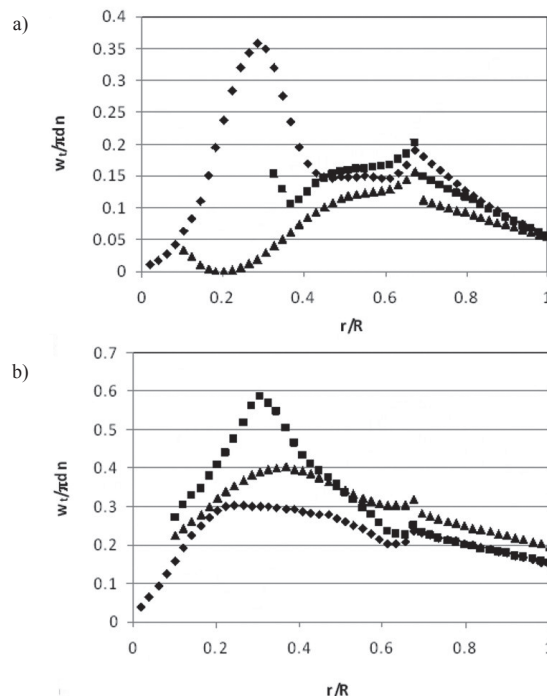
rozmiarze bardziej zaburzają przepływ cieczy i utrudniają uzyskanie jednorodności zawiesiny.

Promieniowe profile bezwymiarowych składowych osiowej i stycznej prędkości płynu dla dwóch wartości czasów trwania mieszania t wynoszących, odpowiednio, 5 i 80 s, zostały porównane na rys. 3 i 4 dla trzech poziomów bezwymiarowej współrzędnej osiowej z/H równych 0,25; 0,33 lub 0,5. W przypadku obu składowych prędkości profile te zależą od czasu mieszania i od wartości współrzędnej osiowej z/H . Na bezwymiarowej wysokości $z/H = 0,5$ rozkłady współrzędnej osiowej wektora prędkości płynu $w_z/\pi dn$ (Rys. 3a, 3b) opisane są krzywymi, których wartości stopniowo wzrastają ze wzrostem bezwymiarowej współrzędnej promieniowej r/R , a ponadto krzywa dla czasu 80 s osiąga maksimum dla wartości r/R około 0,5. W strefie mieszadła ($z/H = 0,33$) oraz pod mieszadłem ($z/H = 0,25$) profile składowej osiowej odzwierciedlają kierunek cyrkulacji płynu w kierunku dna mieszadła i ujawnia się minimum w punkcie odpowiadającym położeniu krawędzi łopatek mieszadła.



Rys. 3. Promieniowe profile składowej osiowej prędkości cieczy $w_z/\pi dn = f(r/R)$ dla trzech różnych wysokości cieczy w zbiorniku (\blacklozenge) $z/H = 0,25$, (\blacksquare) $z/H = 0,33$ oraz (\blacktriangle) $z/H = 0,50$, dla cząstek o średnicy $d_p = 428 \mu\text{m}$ i w czasie t a) 5 s, b) 80 s

Promieniowe rozkłady współrzędnej stycznej wektora prędkości płynu $w_r/\pi dn$ (Rys. 4a, 4b) przyjmują wartości dodatnie i są opisane krzywymi, które dla czasu mieszania 80 s mają maksima w punkcie odpowiadającym położeniu krawędzi łopatek mieszadła. Te wartości maksymalne (Rys. 4b) są największe dla bezwymiarowej współrzędnej $z/H = 0,33$.



Rys. 4. Promieniowe profile składowej stycznej prędkości cieczy $w_r/\pi dn = f(r/R)$ dla trzech różnych wysokości cieczy w zbiorniku (\blacklozenge) $z/H = 0,25$, (\blacksquare) $z/H = 0,33$ oraz (\blacktriangle) $z/H = 0,50$, dla cząstek o średnicy $d_p = 428 \mu\text{m}$ i w czasie t a) 5 s, b) 80 s

Podsumowanie

Na podstawie symulacji numerycznych przeprowadzonych za pomocą komercyjnego oprogramowania ANSYS CFX 12.1 określono charakter przepływu mieszaniny reakcyjnej w postaci zawiesiny wytwarzanej w bioreaktorze zbiornikowym z mieszadłem turbinowym pompującym ciecz w kierunku dna zbiornika (PBT↓). Stwierdzono, że w testowanym zbiorniku bez przegród dominuje składowa styczna prędkości cieczy. Profile prędkości przyjmują podobny rozkład w czasie mieszania 60 i 80 s. Ponadto, wyniki symulacji wykazały, że rozmiar cząstek ciała stałego ma wyraźny wpływ na rozkłady prędkości płynu w bioreaktorze z mieszadłem.

LITERATURA

- [1] Z. Jaworski: Numeryczna mechanika płynów w inżynierii chemicznej, Wyd. EXIT, Warszawa 2005.
- [2] U. A. Syed, R. Panneerselvam., P. Ashok, S. Savithri: Journal of Bioscience and Bioengineering, **109**, 588 (2010).
- [3] R. Panneerselvam, S. Savithri, G. D. Surender: Chemical Engineering Research and Design, **86**, 1331 (2008).
- [4] M. M. S. Cantini, G. B. Fiore, A. Redaelli, M. Soncini: Tissue Engineering: Part A, **14**, 1 (2008).
- [5] T. Atmakidis, E. Y. Kenig: Chemical Engineering Journal, **155**, 404 (2009).
- [6] L. Wang, Y. Zhang, X. Li, Y. Zhang: Chemical Engineering Science **65**, 5559 (2010).
- [7] X. Jia, X. Wang, J. Wen, W. Feng, Y. Jiang: Chemical Engineering Journal, **156**, 451, (2010).
- [8] J. B. Joshi, S. B. Sawant, A. W. Patwardhan, D. J. Patil, S. S. Kshatriya, N. K. Nere: Chemical Engineering Science, **56**, 443 (2001).
- [9] L. Cao: Carrier-bound Immobilized Enzymes: Principle, Application and Design, Wiley-VCH, Weinheim, 2005.

Praca dedykowana Panu Profesorowi Fryderykowi Strękowski z okazji Jubileuszu 85. urodzin.